



TITLE:

液体中の原子の速度相関(「液体金属の構造と物性」,物性研研究会報告)

AUTHOR(S):

守田, 徹; 福井, 芳彦

CITATION:

守田, 徹 ...[et al]. 液体中の原子の速度相関(「液体金属の構造と物性」,物性研研究会報告). 物性研究 1970, 15(2): 83-85

ISSUE DATE:

1970-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88180>

RIGHT:

結果としては、次の所でほぼ合う。

Na $n \sim 6$ (a,b)=(20,9)

Ar $n \sim 9$ (") (95,15)

bar 単位

effective pair potential は liq Ar ではうまく合うが、liq metal ではどういう意味があるのかははっきりしない。metal の場合は core は soft である。

Q*: 武野

Simon eq. は lattice dynamics から、すなわち、リンデマンの式とグリュナイゼン定数を用いて出てくる。特に Volume Change による phonon の frequency ω の変化が重要と思う。

液体中の原子の速度相関

東北大・工 守 田 徹
福 井 芳 彦

単純な液体、特にアルゴンのモデルに対する速度相関関数が Rahman¹⁾により数値計算されている。Rahman の“実験”曲線を理論的に導く試みは多数あるが、Sears²⁾の itinerant oscillator model は簡潔であり、液体中の原子の振舞いを理解する上で有用と考えられる。Sears のモデルは、原子が調和振動子ポテンシャルの中で摩擦力とランダムな力を受け、一方、原子が入っている調和振動子ポテンシャルの中心は Brown 運動をするというものである。以下、このモデルについて論ずる。

I. Sears がこのモデルの記述に用いた方程式 (Langevin 方程式を一般化したもの) は、Nakahara and Takahashi³⁾により注意されたように、揺動-散逸定理を満たさない。我々は原子の速度、調和振動子ポテンシャル

の中心の速度，原子と調和振動子ポテンシャルの中心との相対距離，についての方程式を平等に取扱うことにより，揺動-散逸定理を満す方程式の形がランダムな力に対する仮定と熱平衡でのいくつかの量に対する平均とから一意的に決まることを示した。それにより，Sears の仮定をもとにして Damle, Sjölander and Singwi⁴⁾ が与えた式をあいまいさなしに導くことができる。（詳細は Y.Fukui and T.Morita, J.Phys.c (Sept.1970) p.1839 に掲載予定）。

Ⅱ. Mori⁵⁾ は一般化した Langevin 方程式として初期時刻 0 からの物理量の運動を記述する方程式を導いた。これに対し Kubo⁶⁾ は定常的な (stationary) 一般化した Langevin 方程式について考察している。この式は Mori の導き方で初期時刻を $-\infty$ とすることにより得られることを示す。この場合ランダムな力は，一般の力学変数と同様に Heisenberg の運動方程式を満すことが示される。また摩擦函数 (friction function) はランダムな力の相関函数で書くことができる。

Ⅲ. 前述Ⅰでは調和振動子ポテンシャルの中心という量を導入している。我々は，そのような仮想的な量を使わずに原子の速度に対する一般化した Langevin 方程式において，ランダムな力の相関という形で原子の運動を記述すべく努力しているが，現在まだ成功していない。

文 献

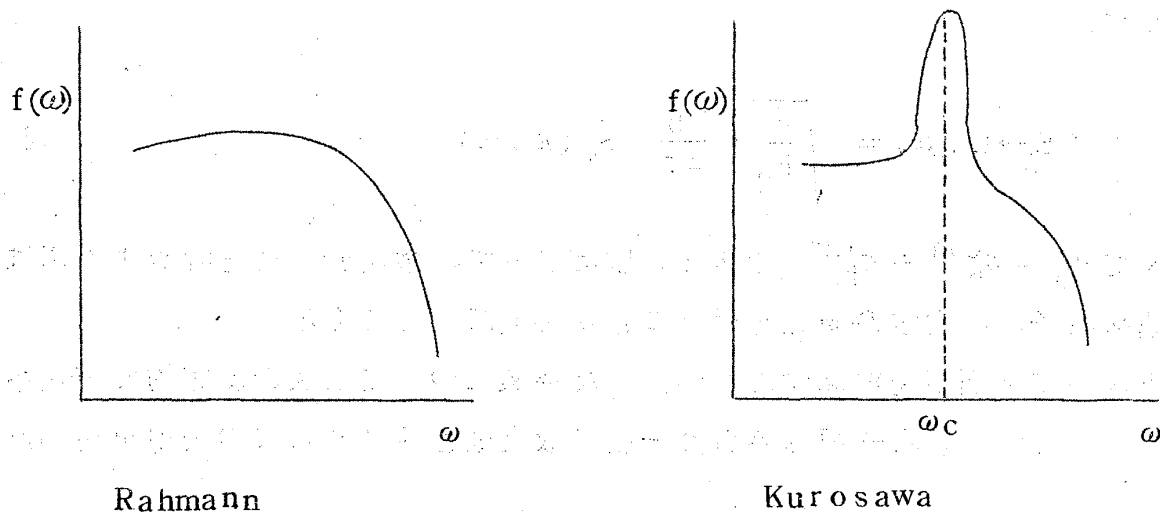
1. A.Rahman, Phys. Rev. 136, A405 (1964)
2. V.F.Sears, Proc. Phys. Soc. 86, 953 (1965)
3. Y.Nakahara and H.Takahashi, Proc. Phys. Soc. 89, 745 (1966).
4. P.S.Damle, A.Sjölander and K.S.Singwi, Phys. Rev. 165, 277 (1968).
5. H.Mori, Prog. Theor. Phys. 34, 399 (1965).

6. R.kubo. Rep. Prog. Phys. 29. 255 (1966).

○コメント (中島)

黒沢氏のコメントの紹介

Sears の model で計算すると, 特定振動数のため, Rahman の図に合わなくなってくる。



液体金属による熱中性子散乱

原 研 中 原 康 明

§ 1. 序

我々原子炉物理をやっている者が物性的な研究を行うのは次のような目的意識に基いている。原子炉の特性を明らかにするには先ず原子炉内部における中性子の振舞いを詳細に解析することが必要である。中性子の熱化を支配するのは中性子減速材と中性子との相互作用, 物理量としては中性子微分散乱断面積である。中性子熱化現象を解明するにはこの微分散乱断面積の定量的に精度の良い数値が必要となってくる。一方, 散乱断面積は動的構造因子 $S(\kappa, \omega)$ 及びその自己成分 $S_s(\kappa, \omega)$ から次式によって求められる